

演 題	分子動力学法による氷中の分子拡散	
発 表 者 (所 属)	○深澤倫子 (科学技術振興事業団 さきがけ研究 21)	
連 絡 先	〒106-8569 東京都港区南麻布4丁目6番7号 文部科学省 統計数理研究所 Tel: 03-5421-8742 Fax: 03-5421-8796 E-mail: fukazawa@ism.ac.jp	
キーワード	Molecular dynamics, Molecular diffusion, Ice	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 など	分子動力学シミュレーションによる氷中の分子拡散メカニズムの解明	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右のいずれかに○をつけてください)	・日本コンピュータ化学会の無償利用 ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他	具 体 的 方 法
	・未定	

[概要]

南極大陸に存在する巨大な氷の塊（氷床）は、過去数十万年の間に雪と共に堆積した様々な物質を保存しているため、過去の気候と環境の変動についての貴重な情報源である。例えば、氷床に保存された空気の組成分析からは、大気中の二酸化炭素やメタンの濃度と気温の相関が示され、これらの分子が近年問題になっている地球温暖化と関連する物質、すなわち温室効果気体であることを示す重要な知見が得られている。ところが最近、過去の大気成分の情報を保存しているはずの氷床内で、空気分子の拡散が生じていることが明らかになった（1, 2）。氷床内で起こる分子拡散は、氷床氷から過去の大気組成を復元する際に重大な影響を及ぼすことになる。しかし、氷結晶中の空

気分子の拡散は非常に遅い現象であるため、実験室レベルのタイムスケールでは観測された例がなく、そのメカニズムは全く明らかになっていなかった。本研究では、スーパーコンピュータを用いた大規模な計算機シミュレーションにより氷結晶中の空気分子の挙動を明らかにし、氷床解析による精密な大気組成復元法を確立しようとする研究を進めている (3)。本講演では、氷結晶中の気体分子のダイナミクスと拡散のメカニズムをナノメートルレベルで解明することを目的として行った一連の分子動力学計算の結果を紹介する。

REFERENCES

- (1) Tomoko Ikeda *et al.*, *Geophys. Res. Lett.* **26** (1999) 91.
- (2) Tomoko Ikeda-Fukazawa *et al.*, *J. Geophys. Res. D* **106** (2001) 17799.
- (3) Tomoko Ikeda-Fukazawa *et al.*, *J. Chem. Phys.* **117** (2002) 3886.

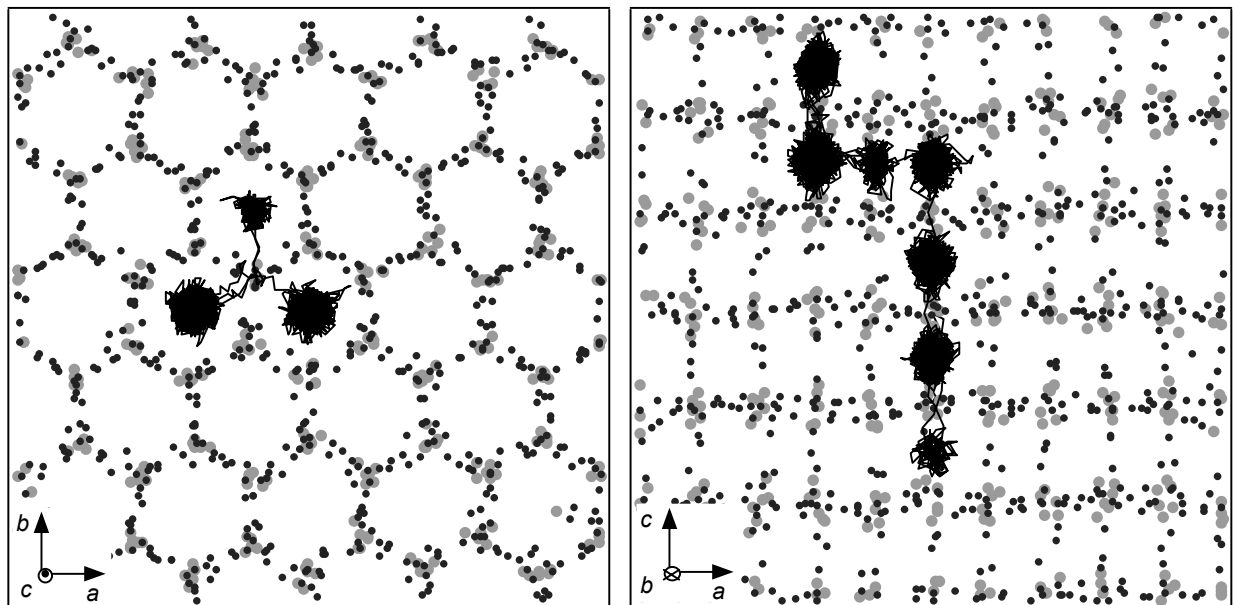


図1：分子動力学計算によって明らかになった氷中のヘリウム原子の拡散軌跡 (3)。グレーと黒の丸は氷格子中の酸素原子と水素原子を、実線はヘリウムの軌跡を示す。